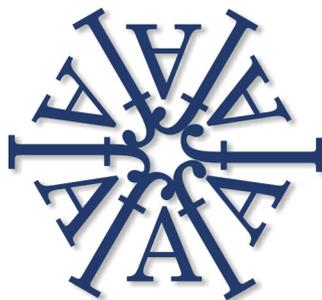


100^a Reunión Nacional
de la
Asociación Física Argentina

22 al 25 de septiembre de 2015
Villa de Merlo, San Luis, Argentina



mecanismos de reacción, mediante los cuales los antioxidantes fenólicos pueden ejercer su rol como atrapantes de radicales libres (RL): el mecanismo de Transferencia de un átomo de hidrógeno (HAT) y el mecanismo de Transferencia simple de un electrón (SET). Ambos mecanismos de captación de RL pueden ser modelados a través de la química computacional. El mecanismo HAT es gobernado por la entalpía de disociación del enlace O-H (EDE), mientras que el mecanismo SET, es gobernado por el proceso de transferencia de un electrón jugando un rol importante el potencial de ionización (PI).

Partiendo del estudio de los efectos de deslocalización electrónica en vacío mediante un análisis de Orbitales Naturales de Enlace (NBO) y del conocimiento detallado de la estructura electrónica de ciertos flavanos [5-8], en este trabajo se avanza en la definición de un nuevo descriptor para el modelado de la capacidad de un antioxidante para captar RL. El análisis de las interacciones hiperconjugativas que vinculan los distintos anillos del sistema revela la existencia de mecanismos de deslocalización de carga electrónica que actúan en forma cooperativa constituyendo caminos de deslocalización?, que muestran interacciones entre los distintos anillos de los sistemas estudiados y que permitirían predecir los sitios de preferencia para el ataque radicalario en la molécula patrón. Se presentan resultados de cálculos utilizando Funcionales de la Densidad (B3LYP) y bases 6-31G(d,p) y 6-311++G(d,p).

Referencias

1. P. Alov, I. Tsakovska, I. Pajeva, *Current Topics in Medicinal Chemistry*, vol. 15, 85-104 (2015)
 2. M. Leopoldini, N. Russo, M. Toscano, *J. Agric. Food Chem*, vol. 55, no. 19, 7944-7949 (2007)
 3. D. Zhang, L. Chu, Y. Liu, A. Wang, B. Ji, W. Wu, F. Zhou, Y. Wei, Q. Cheng, S. Cai, L. Xie, G. Jia, *J. Agric. Food Chem.*, vol. 59, no. 18, 10277-85 (2011)
 4. N. Nenadis, M. P. Sigalas, *J. Phys. Chem. A*, vol. 112, no. 47, pp. 12196-12202 (2008)
 5. E. Bentz, A. Jubert, A. Pomilio, R. Lobayan, *J. Mol. Model* 16:1895-1909 (2010)
 6. R. Lobayan, E. Bentz, A. Jubert, A. Pomilio, *J. Mol. Model*, 18:1667-1676 (2012)
 7. R. Lobayan, E. Bentz, A. Pomilio, *J Comput. Theor. Chemistry* 1006:37-46 (2013)
 8. E. Bentz, A. Pomilio, R. Lobayan, *J. Mol. Model.* 20:2105-2118 (2014)
- E-mail: rmlb@exa.unne.edu.ar (R.M.L.)

314. El papel de las moléculas de agua en la transición de hidrógeno intramolecular en Glicina

Caputo M C¹, Bochicchio R², Provasi P³, Sauer S⁴

¹ *Departamento de Física, Universidad de Buenos Aires, IFIBA, Argentina.*

² *Depto. Física, FCEyN (UBA) - IFIBA - CONICET*

³ *Departamento de Física, Universidad Nacional del Nordeste, Argentina.*

⁴ *Department of Chemistry, University of Copenhagen, Denmark*

Es bien sabido que existe glicina en la fase gaseosa en conformaciones neutras, mientras que en solución de agua la estructura más estable es la zwitterionica. Pero, ¿cuántas aguas son realmente necesarias para estabilizar la estructura zwitterionica y cuál es el estado de transición para el desplazamiento de hidrógeno intramolecular? ¿Incluye explícitamente una de las moléculas de agua o la estabiliza el medio acuoso? Estas y otras preguntas han sido investigadas por nuestro grupo a nivel de la teoría funcional de la densidad empleando el funcional B3LYP funcional y la base 6-31 + G (d, p).

Referencias: a-Christine M. Aikens and Mark S. Gordon *J. AM. CHEM. SOC.* 2006, 128, 12835-12850. b-Norio Takenaka, Yukichi Kitamura Yoshiyuki Koyano, Toshio Asada, Masataka Nagaoka ; *Theor Chem Acc* (2011) 130:215-226 c-Aleksandr V. Marenich, Christopher J. Cramer, and Donald G. Truhlar; *J. Phys. Chem. B* 2009, 113, 6378-6396

315. Espectroscopia de momentos de iones residuales aplicado a procesos de captura e ionización en blancos de Ar a energías intermedias de colisión

Focke P¹, Alessi M², Cariatore D³, Otranto S³

¹ *Centro Atómico Bariloche - Comisión Nacional de Energía Atómica*

² *Investigaciones Aplicadas Sociedad del Estado*

³ *Instituto de Física del Sur - CONICET-UN del Sur*

Usando el espectrómetro de momentos de iones residuales del blanco instalado en el laboratorio del acelerador "Kevatrón" del Centro Atómico Bariloche se realizaron mediciones sobre procesos de colisión de captura electrónica e ionización. Se usaron proyectiles livianos de H y He incidentes sobre un blanco de Ar con energías de 25 hasta 200 keV. El espectrómetro permite efectuar mediciones en coincidencia con el estado de carga de proyectil emergente y también con detección de electrones. De este modo se pueden individualizar los procesos de captura electrónica e ionización, esta última limitada a electrones de baja energía. Se presentan distribuciones de momentos de iones del blanco "longitudinales", en la dirección del haz incidente, y "transversales" logrados para estos procesos, los cuales se comparan con cálculos realizados con el método de trayectorias clásicas Monte Carlo (CTMC).

316. Estructura, modos vibracionales, y potenciales de interacción en moléculas de SF₆

Fuhr J¹, Fainstein P¹, Fregenal D¹, Guozden T², Kaul E¹, Knoblauch P², Lamagna A³, Maceira P², Zarco M², Fiol J¹